# ESTRUTURA ATÔMICA E LIGAÇÃO INTERATÔMICA



#### Olá!

Nesta Unidade de Aprendizagem, abordaremos conceitos de estrutura atômica, configurações eletrônicas nos átomos e os tipos de ligações interatômicas primárias e secundárias. Podemos dizer que as diferenças nas propriedades de ambos os materiais podem ser explicadas pela maneira como os átomos estão ligados.

Bons estudos.

#### Ao final desta Unidade de Aprendizagem, você deve apresentar os seguintes aprendizados:

- Identificar a natureza e a estrutura de um átomo e sua estrutura eletrônica;
- Relacionar os tipos de ligações primárias e secundárias;
- Reconhecer o tipo e a força de ligação nas propriedades dos materiais.



Ao fazer um estudo de campo um estudante se questionou o que acontece quando um material sofre impacto, sendo sólido, identificando não parecer metálico.

Isto reflete a condição da atração das forças moleculares da matéria em questão e a força externa exercida.



#### Ele refletiu e formulou duas questões:

- a) Os sólidos (não metálicos) possuem dureza, tem forma rígida, possuem resistência mecânica, por vezes são quebradiços e não conduzem eletricidade. Quais os fatores relacionados aos átomos constituintes são responsáveis por estas características?
- b) Por que se partiu e não simplesmente amassou? Qual é a explicação que você daria para atendê-lo?

## INFOGRÁFICO

Aqui, é apresentado o esquema do que veremos nesta Unidade referente aos conceitos de estrutura atômica e ligação interatômica.

#### **CONCEITOS ELEMENTARES**

Modelos propostos para a definição e conceitos atômicos



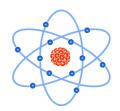
Modelo atômico de Dalton 1803-1808

Em 1803 o cientista John Dalton entendia que a matéria seria formada por partículas maciças chamadas de átomos. Ele propôs que uma reação química pode ser explicada pela separação, combinação ou rearranjo dos átomos.



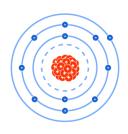
Modelo atômico de Thompson 1887

Segundo o físico britânico, JJ Thompson, o átomo seria uma esfera uniforme de carga positiva repleta de elétrons na superfície.



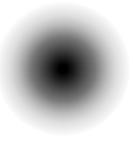
Modelo atômico de Rutherford
1911

Erneste Rutherford conduziu um experimento bombardeando uma lamina muito fina de ouro com partículas a (alfa) positivamente carregadas. Através desse experimento concluiu que é constituído em sua maios parte por espaços vazios. As partículas carregadas positivamente no núcleo foram denominadas prótons, e que sua massa é de 1,672.10-244.



Modelo atômico de Bohr 1913

O físico Nieis Bohr aperfeiçoou o modelo proposto por Rutherford propondo que os elétrons não estavam apenas girando em torno no núcleo, mas possuíam níveis e subníveis que garantiam a estabilidade do átomo.



Princípio da Incerteza 1913

Princípio Incerteza: define que o elétron é bem mais caracterizado pela sua energia do que por sua posição, velocidade ou trajetória. Pode-se determinar a probabilidade relativa de encontrar o elétron numa certa região ao redor do núcleo.



#### CONTEÚDO DO LIVRO

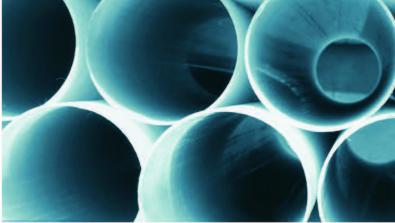
Em meados do século XIX, cientistas observaram que os fenômenos que envolviam os elétrons nos sólidos não podiam ser explicados através da mecânica clássica. Uma compreensão do comportamento dos elétrons nos átomos e nos sólidos cristalinos envolve a discussão de conceitos quânticos-mecânicos.

Acompanhe um trecho do seguinte livro: SMITH, W.F.; HASHEMI, J. Fundamentos de engenharia e ciência dos materiais. 5.ed. Porto Alegre: AMGH, 2012. O livro está na quinta edição e servirá de base teórica para esta Unidade de Aprendizagem. Inicie a leitura a partir do título "Estrutura eletrônica dos átomos".









William F. SMITH Javad HASHEMI

## FUNDAMENTOS DE ENGENHARIA e Ciência dos Materiais









S663f Smith, William F.

Fundamentos de engenharia e ciência dos materiais [recurso eletrônico] / William F. Smith, Javad Hashemi ; tradução: Necesio Gomes Costa, Ricardo Dias Martins de Carvalho, Mírian de Lourdes Noronha Motta Melo. – 5. ed. – Dados eletrônicos. – Porto Alegre : AMGH, 2012.

Editado também como livro impresso em 2012. ISBN 978-85-8055-115-0

1. Engenharia. 2. Ciência dos materiais. I. Hashemi, Javad. II. Título.

CDU 62

Catalogação na publicação: Ana Paula M. Magnus – CRB 10/2052

Capítulo 2 • Estrutura e Ligações Atômicas

21

#### 2.3 ESTRUTURA ELETRÔNICA DOS ÁTOMOS

#### 2.3.1 Teoria quântica de Planck e radiação eletromagnética

No início dos anos 1900, Max Planck<sup>15</sup>, um cientista alemão, descobriu que os átomos e as moléculas emitem energia somente em certas quantidades discretas, denominadas **quanta**. Até então, os cientistas acreditavam que a energia, em qualquer quantidade (contínua), podia ser emitida de um átomo. A *teoria quântica* de Max Planck mudou os rumos da ciência. A fim de entender essa descoberta, deve-se partir primeiro da natureza das ondas.

Há muitos tipos diferentes de onda, como, por exemplo, ondas na água, ondas sonoras e ondas de luz. Em 1873, James Clerk Maxwell $^{16}$  sugeriu que a luz visível é, na verdade, radiação eletromagnética. Na **radiação eletromagnética**, energia é liberada e transmitida sob a forma de ondas eletromagnéticas, que se propagam à velocidade da luz, c, igual a 3,00  $\times$  10 $^8$  m/s (186.000 milhas/h) no vácuo.

<sup>&</sup>lt;sup>14</sup>Henry G. J. Moseley (1887-1915). Físico inglês.

<sup>&</sup>lt;sup>15</sup>Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858-1947). Físico alemão e ganhador do prêmio Nobel (1918). Três dos seus orientados de doutorado também receberam o prêmio Nobel. <sup>16</sup>James Clerk Maxwell (1831-1879). Matemático e físico escocês.

6	Lantanídeos	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
		140,1	140,9	144,2	(145)	150,4	152,0	157,3	158,9	162,5	164,9	167,3	168,9	173,0	175,0
		90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
7	Actinídeos	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
		232,0	(231)	238,0	(237)	(242)	(243)	(247)	(247)	(251)	(252)	(257)	(258)	(259)	(260)

**Figura 2.3**Tabela periódica atualizada mostrando os sete períodos, oito grupos principais de elementos, elementos de transição e elementos de transição interna. Observar que a maioria dos elementos é classificada como metais ou metaloides.

Como em qualquer outra forma de onda, as características importantes que definem ondas eletromagnéticas são o comprimento de onda (normalmente dado em nm ou  $10^{-9}$  m), frequência (s<sup>-1</sup> ou Hz) e velocidade (m/s). A velocidade da onda, c, se relaciona à sua frequência, v, e ao seu comprimento de onda,  $\lambda$ , por

$$v = \frac{c}{\lambda} \tag{2.1}$$

Vários tipos de ondas eletromagnéticas, incluindo-se ondas de rádio, micro-ondas, infravermelho, visível, ultravioleta, raios X e raios gama são apresentados na Figura 2.4. Estas ondas diferem entre si pelos seus comprimentos de onda e frequências. Por exemplo, uma antena de rádio gera grandes comprimentos de onda  $(10^{12} \text{ nm} \sim 1 \text{ km})$  e baixa frequência  $(10^{6} \text{ Hz})$ ; um forno (do tipo micro-ondas) produz micro-ondas com comprimentos de cerca de  $10^{7}$  nm (muito menores do que aquelas das ondas de rádio) e frequências de  $10^{11}$  Hz (muito maiores). À medida que o comprimento de onda diminui e a frequência aumenta, chega-se à faixa do infravermelho com comprimento de onda de  $10^{3}$  nm e frequência de  $10^{14}$  Hz (as lâmpadas incandescentes operam

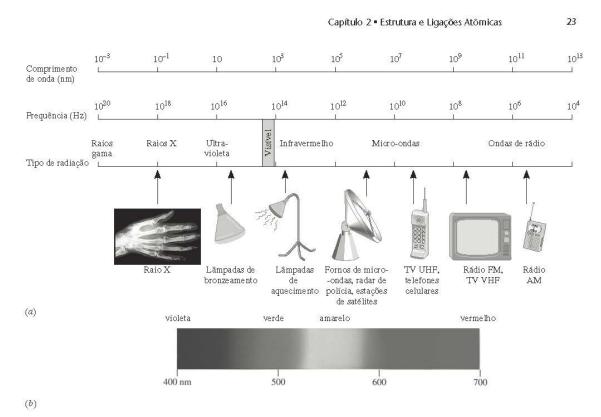


Figura 2.4

O espectro eletromagnético que se estende dos raios gama, com pequeno comprimento de onda e alta frequência, às ondas de rádio, com grandes comprimentos de onda e baixa frequência. (a) Espectro completo. (b) Espectro visível.

nesta faixa). Quando o comprimento de onda estiver na faixa de 700 nm (luz vermelha) a 400 nm (violeta), a radiação resultante torna-se visível (faixa do visível). Os raios ultravioleta (10 nm), os raios X (0,1 nm) e os raios gama (0,001 nm) recaem novamente na faixa do não visível.

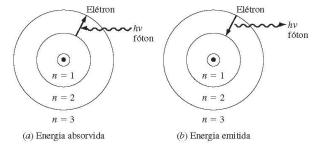
Quando, por exemplo, um filamento de tungstênio é aquecido, seus átomos emitem energia sob a forma de radiação eletromagnética que vemos como luz visível branca. Planck sugeriu que os átomos que emitem esta radiação o fazem em quantidades discretas (*quanta*). A energia contida em um único quantum de energia é dada pela seguinte equação, na qual h é a constante de Planck igual a  $6,63 \times 10^{-34} \, \mathrm{J.s}$  (Joules.segundo) e  $\nu$  é a frequência de radiação (Hz).

$$E = h\nu ag{2.2}$$

Mais precisamente, segundo Planck, energia é sempre emitida em múltiplos inteiros de *hv* (1 *hv*, 2 *hv*, 3 *hv*, ...) e nunca em múltiplos não inteiros, por exemplo, 1,34 *hv*. A Equação 2.2 também implica que, à medida que a frequência da radiação aumenta, sua energia também aumenta. Desse modo, referindo-se ao espectro eletromagnético, os raios gama têm mais energia do que os raios X; os raios X, mais energia do que os raios ultravioleta, e assim por diante.

Inserindo a Equação 2.1 na Equação 2.2, a energia associada a uma dada forma de radiação pode ser calculada em termos do seu comprimento de onda:

$$E = \frac{hc}{\lambda} \tag{2.3}$$



**Figura 2.5**(a) O elétron de hidrogênio sendo excitado para uma órbita mais alta.
(b) Um elétron de hidrogênio em uma órbita mais alta descendo para uma órbita mais baixa, resultando na emissão de um fóton de energia  $\hbar v$ .
(Esta figura é aceitável somente para o modelo de Bohr.)

#### 2.3.2 Teoria de Bohr do átomo de hidrogênio

Em 1913, Neils Bohr<sup>17</sup> se baseou na teoria quântica de Max Planck para explicar como átomos de hidrogênio excitados absorvem e emitem luz somente em certos comprimentos de onda, um inexplicado fenômeno na época. Ele sugeriu que os elétrons se movem ao longo de trajetórias circulares em torno do núcleo com valores discretos de momento angular (produto da velocidade pelo raio). Sugeriu ainda que a energia do elétron seja limitada por um nível de energia que fixa a distância radial do elétron ao núcleo. Ele chamou essa trajetória circular fixa de *órbita* do elétron. Se um elétron perde ou ganha uma quantidade determinada de energia, ele mudará de uma órbita para

outra a uma distância fixa do núcleo (Figura 2.5). Nesse modelo, o valor da órbita — o número quântico principal n — pode variar de 1 ao infinito. A energia do elétron e o raio de sua órbita aumentam à medida que n aumenta. A órbita correspondente a n = 1 representa o nível de energia mais baixo e, portanto, é a mais próxima do núcleo. O estado normal do elétron de hidrogênio se dá para n = 1 e é chamado de estado fundamental. Para um elétron se mover de uma órbita mais baixa, por exemplo, do estado fundamental n = 1, para uma órbita mais alta correspondente a um estado excitado, n = 2, ele deve absorver uma quantidade definida de energia (Figura 2.5). Inversamente, quando um elétron se move de um estado excitado, n = 2, para o estado fundamental, n = 1, a mesma quantidade de energia deve ser liberada. Conforme explicado anteriormente, este quantum de energia emitida ou liberada ocorre sob a forma de radiação eletromagnética, denominada **fóton**, com comprimento de onda e frequência determinados.

Bohr desenvolveu um modelo para a determinação da energia permitida ao elétron de hidrogênio em função do seu estado quântico, n (Figura 2.6). Somente níveis de energia calculados por esta equação são permitidos:

$$E = -2\pi^2 m e^4 / n^2 h^2 = \frac{-13.6}{n^2 \text{ eV}}$$
 (2.4)

na qual m e e são a massa e a carga do elétron, respectivamente, e  $1 \text{ eV} = 1,60 \times 10^{-19} \text{ J}$ . O sinal negativo foi introduzido porque Bohr atribuiu o valor zero à energia de um elétron completamente isolado e sem energia cinética em n = infinito. Logo, a energia de qualquer elétron em uma órbita mais baixa seria negativa. Segundo a equação de Bohr, a energia de um elétron no estado fundamental, n = 1, é -13,6 eV. A fim de separar o elétron de seu núcleo, deve-se fornecer-lhe energia. A energia mínima requerida para se realizar esta tarefa é chamada de **energia de ionização**. À medida que n aumenta, a energia associada ao elétron em uma determinada órbita também aumenta (se torna menos negativa). Por exemplo, em n = 2, o nível correspondente de energia é  $13,6/2^2$  ou -3,4 eV.

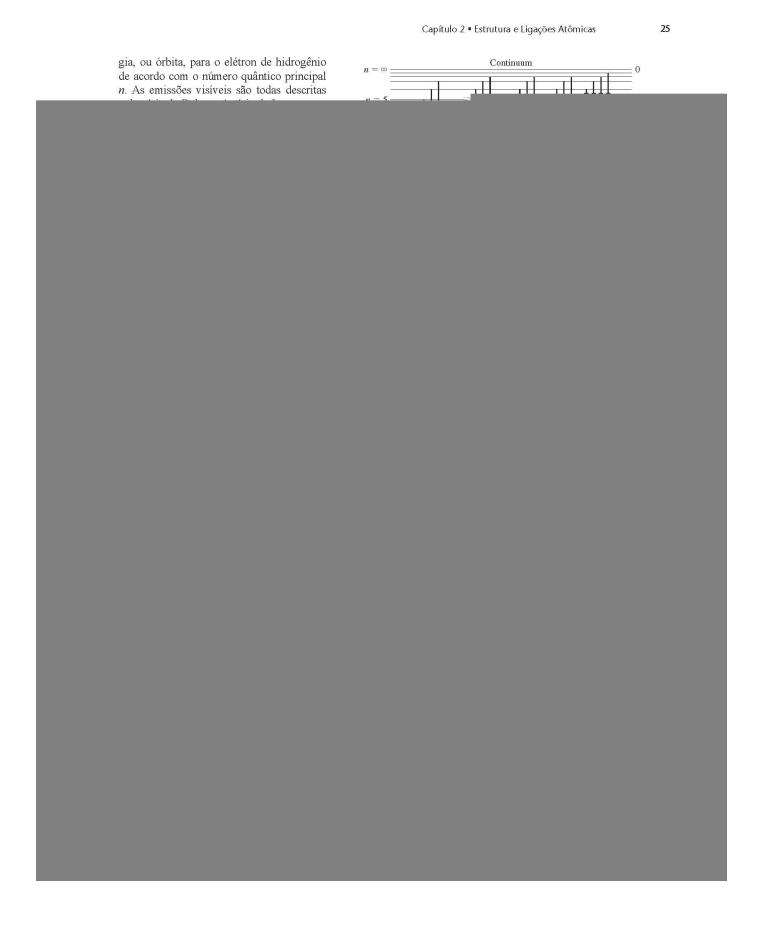
Bohr explicou a quantidade de energia liberada ou absorvida pelo elétron quando muda de órbita em termos da diferença de energia do elétron entre as órbitas inicial e final ( $\Delta E > 0$  quando energia é liberada e  $\Delta E < 0$  quando energia é absorvida).

$$\Delta E = E_f - E_i = -13.6 (1/n_f^2 - 1/n_i^2)$$
 (2.5)

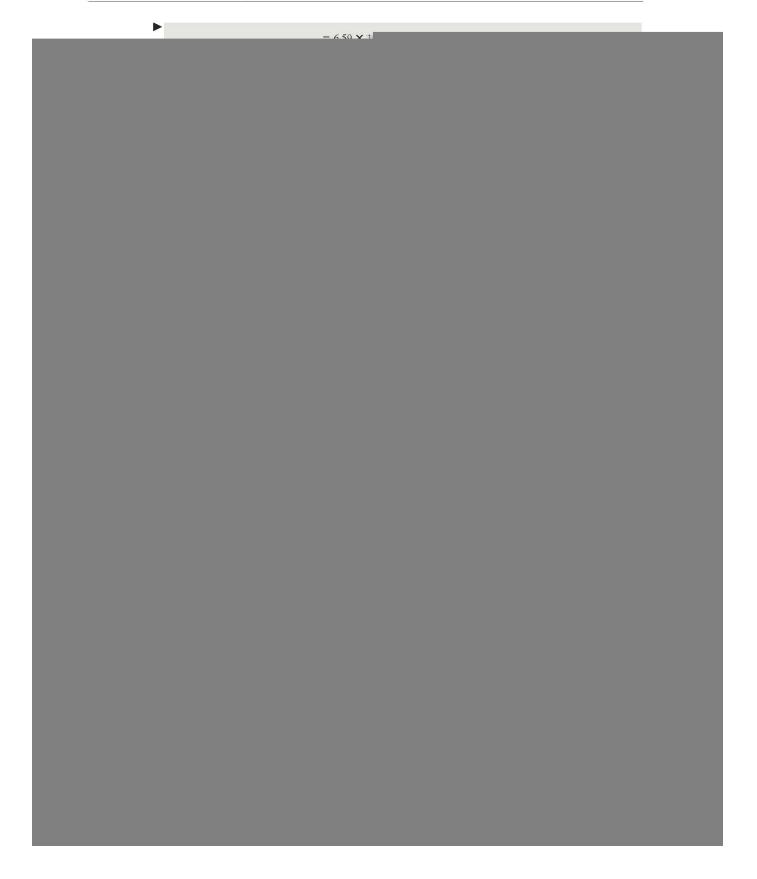
onde f e i representam os estados final e inicial do elétron, respectivamente. Por exemplo, a energia associada à transição de n=2 a n=1 seria  $\Delta E=E_2-E_1=-13,6$  ( $1/2^2-1/1^2$ ) =  $13,6\times0,75=10,2$  eV. O elétron emite um fóton de 10,2 eV ao descer para n=1 (energia é liberada). O comprimento de onda deste fóton é determinado por  $\lambda=hc/E=(6,63\times10^{-34}~\mathrm{J\cdot s})$  ( $3,00\times10^8~\mathrm{m/s}$ )/10,2 eV ( $1,6\times10^{-19}~\mathrm{J/eV}$ ) =  $1,2\times10^{-7}~\mathrm{m}$  ou 120 nm. Na Figura 2.4, este comprimento de onda corresponde à faixa do ultravioleta.

Várias transições possíveis do elétron de hidrogênio ou do espectro de emissão do hidrogênio são apresentadas na Figura 2.6. Nesta figura, cada linha horizontal representa um nível aceitável de ener-

<sup>&</sup>lt;sup>17</sup>Neils Henrik Davis Bohr (1885-1962). Físico dinamarquês e ganhador do prêmio Nobel (1922).



26 Fundamentos de Engenharia e Ciência dos Materiais



27

O comprimento de onda da bola de beisebol é  $10^{24}$  vezes menor do que aquele do elétron (pequeno demais para ser observado). Em geral, partículas com tamanhos usuais têm comprimentos de onda imensuravelmente pequenos e não se podem determinar suas propriedades ondulatórias.

No exemplo anterior, se a incerteza associada à medida da velocidade da bola de beisebol for (a) 1% e (b) 2%, quais são as incertezas correspondentes na posição da bola de beisebol? Qual é a sua conclusão?

#### EXEMPLO 2.5

#### Solução

De acordo com a Equação 2.7, o valor de incerteza na medida da velocidade é  $(0.01 \times 42.91 \text{ m/s}) = 0.43 \text{ para a parte (a)} = (0.02 \times 42.91) = 0.86 \text{ m/s para a parte (b)}.$ 

a. Reescrevendo a Equação 2.7, obtém-se:

$$\Delta x \ge \frac{h}{4\pi m \Delta u} \ge \frac{6,62 \times 10^{-34} \text{kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}}{4\pi (0,142 \text{kg})(0,43 \text{ m/s})} \ge 8,62 \times 10^{-34} \text{m}$$

b. Reescrevendo a Equação 2.7, obtém-se:

$$\Delta x \ge \frac{h}{4\pi m \Delta u} \ge \frac{6.62 \times 10^{-34} \,\text{kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}}{4\pi (0.142 \,\text{kg})(0.86)} \ge 4.31 \times 10^{-34} \,\text{m}$$

À medida que a incerteza na medida da velocidade aumenta, a incerteza na medida da posição diminui.

O raciocínio de Heisenberg se baseou no fato de que qualquer tentativa de medida alteraria a velocidade e a posição do elétron. Heisenberg também rejeitou o conceito de Bohr de uma "órbita" de raio fixo para o elétron; ele afirmou que o melhor que se pode fazer é trabalhar com a probabilidade de se encontrar um elétron com uma dada energia em uma determinada região do espaço.

Chegou-se ao entendimento quase completo quando Erwin Schrodinger<sup>20</sup> usou a equação da onda para explicar o comportamento dos elétrons. A solução da equação da onda foi dada em termos da função de onda,  $\psi$  (psi). O quadrado da função de onda,  $\psi^2$ , representa a probabilidade de se encontrar um elétron com um dado nível de energia em uma dada região do espaço. Essa probabilidade é denominada **densidade eletrônica** e pode ser expressa graficamente por uma matriz de pontos (chamada *nuvem eletrônica*), na qual cada ponto expressa a posição possível para um elétron com um dado nível de energia. Por exemplo, a distribuição de densidade eletrônica na Figura 2.7a se refere ao átomo de hidrogênio no estado fundamental. Embora o formato geral seja esférico (conforme sugerido por Bohr), o que este modelo deixa claro é que o elétron pode se situar em qualquer posição ao redor do núcleo. Mais ainda, a probabilidade máxima de se encontrar um elétron no estado fundamental ocorre em uma região muito próxima ao núcleo (onde a densidade de pontos é máxima). Ao se distanciar do núcleo, a probabilidade de se encontrar um elétron diminui.

Ao se resolver a equação da onda, diferentes funções e, portanto, diferentes gráficos de densidade eletrônica, serão obtidos. Essas funções de onda são chamadas de **orbitais**. É importante distinguir imediatamente o termo "orbital" aqui citado do termo "órbita" empregado por Bohr. Esses termos representam dois conceitos distintos e não devem ser usados indistintamente. Um orbital tem distribuição, bem como nível de energia, característico de densidade eletrônica.

Outra maneira de representar probabilisticamente a posição de um elétron com um dado nível de energia é pelo traçado da fronteira no interior da qual se tem 90% de chances de se encontrar esse elétron. No estado fundamental, há 90% de probabilidade de se encontrar um elétron no interior de uma esfera de raio igual a 100 pm. A esfera na Figura 2.7b é uma alternativa ao diagrama de densidade ele-

<sup>&</sup>lt;sup>20</sup>Erwin Rudolf Josef Schrodinger (1887-1961). Físico austríaco e ganhador do prêmio Nobel (1933).

### - DICA DO PROFESSOR

Acompanhe o vídeo no qual abordaremos os conceitos de estrutura atômica e ligação interatômica.

Conteúdo disponível na plataforma virtual de ensino. Confira!



- 1) Através do conceito que aprendemos sobre estruturas eletrônicas, assinale a alternativa que explique por que a temperatura de fusão do sódio (89ºC) é maior do que a temperatura de fusão do potássio (63,5ºC).
  - a) O tipo de ligação presente no sódio é iônica e, portanto, mais forte dos que as ligações presentes no potássio, que é covalente.
  - b) Os átomos de sódio possuem ligações metálicas mais fortes, uma vez que seu raio é menor que o do potássio.
  - c) Ambos os elementos apresentam ligações covalentes. Porém, o ponto de fusão do sódio é mais elevado devido a sua maior capacidade em compartilhar elétrons.
  - d) Ambos os elementos apresentam ligações covalentes. Porém, o ponto de fusão do potássio é inferior devido a sua maior capacidade em compartilhar elétrons.
  - e) Os átomos de potássio possuem ligações metálicas mais fortes, uma vez que seu raio é maior do que o do sódio.
- 2) O polipropileno é um polímero ou plástico derivado do propeno ou propileno e possui forma molecular (C3H6)x. Dentre as suas principais propriedades, podemos citar alta resistência à fratura por flexão ou fadiga, boa resistência ao impacto e boa

processabilidade (fácil moldagem). Esse tipo de material é amplamente utilizado para a confecção de utensílios domésticos, brinquedos, componentes automotivos, entre outros. Com base nessas considerações e no conteúdo apresentado até o momento, identifique qual das alternativas apresenta o correto tipo de ligação presente nos polímeros.

- a) Os polímeros apresentam ligações metálicas através da formação de um "mar de elétrons".
- b) Os polímeros apresentam ligações iônicas.
- c) Os polímeros apresentam ligações covalentes.
- d) Os polímeros apresentam ligações do tipo força de van der Waals.
- e) Os polímeros apresentam ligações de hidrogênio que resultam da força de atração entre dipolos elétricos.
- 3) Sabemos que a ligação iônica é o resultado da atração entre os íons negativo (ânion) e positivo (cátion) e geralmente é encontrada em compostos cuja composição envolve tanto metais como não metais. Em uma ligação iônica perfeita, há uma transferência completa de carga eletrônica de um átomo para outro. Com base no seu conhecimento a respeito de ligações iônicas, assinale a alternativa que corresponda ao composto que possua o maior caráter iônico dentre os citados a seguir: KF, CsCl, NaCl, KBr e LiBr.
  - a) O brometo de lítio possui o maior caráter iônico de ligação.
  - b) O fluoreto de potássio possui maior caráter iônico de ligação.
  - c) O cloreto de césio possui maior caráter iônico de ligação.
  - d) O cloreto de sódio possui maior caráter iônico de ligação.
  - e) O brometo de potássio possui maior caráter iônico de ligação.
- 4) Escolha a alternativa que explique por que o fluoreto de hidrogênio possui temperatura de ebulição mais elevada do que o cloreto de hidrogênio. Temperatura de fusão 19,4ºC versus -85ºC, apesar de o fluoreto de hidrogênio possuir um peso molecular menor.

- a) Essa diferença pode ser explicada devido à presença de ligação de hidrogênio entre as moléculas do fluoreto de hidrogênio. Já o cloreto de hidrogênio possui uma força de atração menor resultante de um momento dipolar permanente.
- b) O fluoreto de hidrogênio apresenta ligações primárias e o cloreto de hidrogênio apresenta ligações secundárias, mais fracas; logo, seu ponto de fusão é menor.
- c) O fluoreto de hidrogênio possui temperatura de fusão mais elevada devido ao tipo de ligação entre seus átomos, nesse caso, ligação iônica. Já o cloreto de hidrogênio apresenta ligações do tipo dipolo.
- d) O cloreto de hidrogênio possui menor temperatura de fusão devido ao tipo de ligação de dipolo induzido flutuante, diferentemente do fluoreto de hidrogênio, que apresenta ligações mais fortes do tipo pontes de hidrogênio.
- e) Ambos apresentam ligação do tipo dipolo induzido flutuante. O fluoreto de hidrogênio possui temperatura de fusão mais elevada devido à diferença de eletronegatividade ser maior do que no cloreto de hidrogênio.

#### 5) Sobre a tabela periódica e sua utilização, assinale a alternativa incorreta.

- a) O elemento cloro é menos eletronegativo que o elemento sódio.
- b) Os elementos do Grupo IA e IIA possuem, respectivamente, um e dois elétrons em excesso em relação às estruturas estáveis.
- c) Todos os elementos da tabela periódica foram classificados de acordo com suas configurações eletrônicas.
- d) Os elementos do grupo 0 possuem configurações eletrônicas estáveis.
- e) O flúor é mais eletronegativo que o oxigênio.



O carboneto de silício é o único composto estável no sistema de equilíbrio Si-C à pressão atmosférica. A única ocorrência de SiC na natureza é em meteoritos, pelo que não pode ser minado e precisa ser manufaturado artificialmente. É um composto constituído por carbono e silício cuja maioria é ligada covalentemente.



Para ampliar o seu conhecimento a respeito desse assunto, veja abaixo as sugestões do professor:

Ensaio de tração

Conteúdo disponível na plataforma virtual de ensino. Confira!

Bonding and electronic structure of sillenites

Conteúdo disponível na plataforma virtual de ensino. Confira!

Study of the influence of ceramic thermal coating on the mechanical resistence of the blades of aircraft engines

Conteúdo disponível na plataforma virtual de ensino. Confira!